



TITLE:

ミクロシミュレーションで探る非
平衡現象(第53回物性若手夏の学校
(2008年度),講義ノート)

AUTHOR(S):

湯川, 諭

CITATION:

湯川, 諭. ミクロシミュレーションで探る非平衡現象(第53回物性若手夏の学校(2008年度),講義ノート). 物性研究 2009, 91(5): 639-651

ISSUE DATE:

2009-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/142751>

RIGHT:

ミクロシミュレーションで探る 非平衡現象

湯川 諭

大阪大学大学院理学研究科宇宙地球科学専攻

yukawa@ess.sci.osaka-u.ac.jp

概要

計算機を使った物理研究が本格的に始まってから約 60 年になる。当初より統計物理学研究に応用され、計算対象も平衡系から非平衡系へとひろがり、計算規模も指数関数的な増加を見せている。このテキストでは、現在の計算機の能力を踏まえ、マクロな非平衡現象に対しミクロな自由度のシミュレーションから迫ってみたい。コンピュータの中で、直接、非平衡状態を再現することにより、非平衡状態のより深い理解や記述が得られると思われるからである。具体的な内容として、計算モデル、手法の紹介からはじめ、例として流体现象の再現、また極限状況下での構造形成の問題を取り上げる。

1 はじめに

前世紀中頃に電子計算機が実用化され、その進歩とともに計算機を使った物理の研究が盛んに行われるようになった。現代では、従来の物理学の方法論である実験および理論に加えて、新たな方法論を確立したと言っても過言ではない。計算機を使った初期の研究に、1950 年代の Fermi、Pasta、Ulam による非線形格子系の計算がある。[1] 彼らの計算機シミュレーションでは、理論が当時予測し得なかった結果をコンピュータが導き出したが故に、その後に大きな影響を与えた。また、同時期に Alder と Wainwright は、剛体球や剛体円盤の、いわゆる分子動力学シミュレーションを行い、[2, 3] 剛体的な相互作用のもとで、固液転移を発見した。これは Alder 転移と呼ばれる。Alder 転移の発見は、粒子一つ一つをシミュレーションすることにより、計算機内に相転移現象を再構成したという点で非常に重要である。¹ これらの研究以降、計算機を使った物理研究「計算物理学」

¹このような簡単な系にもかかわらず、二次元における Alder 転移の性質はながらく議論が続いていた。しかし近年、流体相から Hexatic 相、Hexatic 相から固相への二次転移が二回おきるという Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTHNY) 理論 [4, 5, 6] を示唆する大規模シミュレーションの結果が得られ、議論は収束に向かいつつある。[7, 8]

は盛んに行われるようになり、現在、理論物理学・実験物理学と対比される第3の方法の地位を確立している。

理論や実験にも得手不得手があるように、計算物理にも他と比較して有利な点、不利な点がある。例えば、実験物理と比較すると、実験にはつきものの制御しきれない要因を完全に排除できるという利点がある。計算物理学では、計算機の中に系を再構成するため、その中には人が制御できない要因はなく、完全にすべてを制御下におくことができる。実験的に実現できないような状況をも作り出せるのである。また、理論物理と比較するならば、Fermi らの研究にみられるように、理論が予測し得なかったことを発見することができる。理論物理では、現象の本質を探るためどうしても様々なものを切り捨てる方向で研究が進むことが多い。計算物理ではそれら切り捨てられたものもうまく吸収することができる。理論が捨ててしまったことで、実は本質的であったことを発見できる可能性があるのである。利点をいくつか述べたが、当然、計算物理にも不利な点がある。それは使用する計算機的能力に限りがあることである。限りある計算機的能力の中で、最大の成果を上げるためには、その計算機的能力に応じた問題を考える必要がある。ただ闇雲に計算機をつかって研究すればいいというものではないのである。

計算機の進歩とともに、計算物理の対象とできる現象も変わりつつある。Moore の法則によると、[9] 計算機の CPU にあるトランジスタの数は二年で倍になり、実際そのペース、もしくはそのペース以上で計算機の進歩は進んでいる。Alder の時代、1957 年には UNIVAC や IBM-704 という計算機を使い、1000 個弱の粒子で熱平衡状態の状態方程式が計算された。熱平衡状態の計算は、非平衡状態と比較すると時空の相関が短く、計算時間が短くすむという利点がある。Alder の 10^3 個が、50 年後の 2007 年、Glosli らが受賞した Gordon Bell prize の計算では、 2×10^9 から 62.5×10^9 個の相互作用をする粒子となり、計算機に至っては、212992 CPU をもつ BlueGene/L というスーパーコンピュータになった。[10] そこで計算された現象は、流体力学的な不安定性である Kelvin-Helmholtz 不安定性であり、偏微分方程式で記述されるような不安定性を微視的な粒子モデルで計算したことになる。このように 50 年の間に、粒子数が約 1000 万倍になり、ほぼ Moore の法則に従って計算規模が増大している。また、計算された現象も、比較的計算時間を必要としない熱平衡の現象から、計算時間を必要とする非平衡現象へと変わってきている。

平衡現象の計算時間をおおざっぱに見積もってみよう。系の線形サイズを L として、3 次元で L^3 に比例する粒子数がある。また現象の時間スケールは局所的な緩和でよいとすれば、システムサイズ L から決まる時間スケールに比べて、十分に小さな時間スケールで記述できる。よって、 L^3 の計算量が必要である。これと比較して非平衡現象では、現象の時間スケールがどうしても系全体に影響が渡る時間まで大きくなってしまふ。これより計算量は L^4 となる。このように非平衡系の現象を調べる方が、計算量がたくさん必要である。計算機の進歩を考えると、非平衡系がまさしく今世紀の微視的シミュレーションによる研究のターゲットとなり、またようやくそのような現象を計算機で調べる事が可

能になってきたといえる。「計算機に使われず、逆に計算機を使う」為には、今こそ非平衡現象の理解へ向けての計算物理学を進める時期であろう。

ここではわれわれは非平衡現象の中でも、特に流れや輸送現象、構造形成などの非平衡現象に注目する。これらの現象は、歴史的には連続体のモデルで記述され解析されてきた。そもそも連続体の記述は、計算機がなかった時代に解析しやすく人が理解しやすいように作られたものである。しかし、今日の計算機的能力を背景とした大規模計算の時代には、もっと違った記述があっても良いはずである。そのような記述として、われわれは連続体の挙動をミクロなレベルの自由度でモデル化するという記述をとろう。連続体のモデルを使い、それをメッシュで切って計算するという戦略もあり得るが、研究のターゲットとして今までのような連続体の記述が難しい自由界面を含むものや、上で例に出した Gordon Bell prize の計算のように、界面の不安定性、自発的な界面生成などを考えれば、われわれの立場の方が有利であろう。

このように、現象をミクロな自由度のモデル化から再現するという立場をとると、すぐに思いつくのが、いわゆる第一原理計算のような実在する原子や分子の運動をそのまま計算する分子動力学法 (Molecular Dynamics) である。しかし、われわれはあくまで物の種類にとらわれない物理を調べたいのであるから、ミクロ自由度の詳細を忠実に再現して、マクロ現象を再構成することに興味はない。ミクロな自由度を抽象化し、それらからあらわれる物理現象に興味があるのである。この点を強調するために、ここでは分子動力学法ではなく、粒子動力学法 (Particle Dynamics) と呼ぶことにする。また連続体で記述されてきたような現象を、自由に運動する離散的な自由度でモデル化するというと、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)[11] や、Moving Particle Semi-implicit method (MPS 法)[12, 13] などの Lagrange 的なモデル化が思いつくが、これらは、元々の発想が連続体の方程式を満たすように場を Lagrange 的な連続体要素で離散化するということであり、あくまで連続体の方程式に従う離散要素をつかうのが前提である。よってはじめにモデル化した連続体方程式をこえる現象を再現することは決してない。

ここで述べたような立場で研究をおこなっているのは筆者とその共同研究者らのグループだけではない。たとえば Rapaport[14] は早くからそのような立場で研究を行い、いくつかの成果を発表してきた。文献 [15, 16] では、流体の回転不安定性である Taylor 不安定性を Lennard-Jones 相互作用の斥力部分のみをつかった相互作用をする粒子系で再現している。また、文献 [17] では、対流にみられる Rayleigh-Bénard セルを同じ粒子モデルで再現している。連続体の取り扱いでは難しい気泡の発生から消滅のダイナミクスを計算した例もある。文献 [18] では、Lennard-Jones 粒子系で計算し、Rayleigh-Plesset 方程式の記述と比較している。また、文献 [19, 20] では、Lennard-Jones 粒子を用いた気泡生成と連続体記述をより詳細に検討している。さらには、連続体の記述では手も足も出ないと思われる脂質二重膜の運動や分離を、Lennard-Jones 粒子でモデル化した研究もある。[21] ここでは、脂質を Lennard-Jones 相互作用をする 3 粒子で粗視化して記述し、膜の運動や分

離を非常にうまく再現している。第一原理的な分子動力学法では計算量の観点からどうすることもできない系を、抽象化した脂質分子モデルを使うことで非常にうまく取り扱っている例である。またこの研究は、ミクロ自由度で記述されたマクロ自由度の運動を計算しているという点で、今後の非平衡計算物理学の目指すべき方向を示しており、非常に興味深い。

2 粒子動力学法: Particle Dynamics

2.1 抽象的粒子モデル

粒子動力学法では、現象を再現するために最小の構成要素として粒子を用いる。粒子間に相互作用を設定し、それを基本的には Newton の運動方程式に従って積分することで、粒子の運動を得、そこからマクロな挙動を再現する。粒子間の相互作用は、考えている現象、再現したい現象に応じて適切に決める必要がある。典型的には以下のようなものがとられる。一つは剛体的相互作用であり、粒子間の中心距離がある値以下になると、ポテンシャルが無限大に発散するようなものである。ポテンシャルが無限大に発散するので、時間差分型の運動方程式の解法では力が発散し計算できないが、事象駆動型の解法では容易に運動方程式を積分することができる。剛体相互作用を時間差分型の解法でも使えるように制限を緩めたものとして理解できるのが、Hertz 型の相互作用である。Hertz 相互作用は元々弾性体の接触エネルギーをモデル化したものであり、[22] 直径 σ の三次元弾性球同士の接触に対し、中心間距離 r の時に

$$\phi(r) = E(\sigma - r)^{5/2} \quad (1)$$

という二体ポテンシャルが働くとする。 r が σ より大きければ、接触していないとして相互作用を 0 にする。この相互作用ポテンシャルの係数である E は Young 率に比例し、これを十分に大きく取れば剛体相互作用に漸近する。

剛体相互作用や Hertz 相互作用では、マクロな熱力学相としては流体相と固相しか表現できない。気相や液相を表現するためには、ここに引力相互作用を入れる必要がある。もっともよく用いられるのが Lennard-Jones 相互作用であり、二体ポテンシャルとして

$$\phi(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (2)$$

を用いる。エネルギースケール ϵ や粒子直径 σ のパラメーターに分布を持たせると、ガラス的な挙動を示したり、相分離挙動を示したりすることが知られている。この Lennard-Jones 相互作用はよく知られており、温度、密度、圧力に対する相図なども得られている。

その他現象に応じてさまざまなモデルが用いられる。例えばガラス的な挙動を再現したいときには、Lennard-Jones 相互作用でも述べたが、粒子直径に分散性を入れたモデル

を用いる。(例えば文献[23, 24]) また液晶などの振る舞いを再現したいときには、非等方的な相互作用を取り扱わなければならない。そのときは、円柱や回転楕円体など球対称性を破った様々な形をした粒子を用いることがある。(例えば文献[25, 26]) 高密度の現象を取り扱うときに、剛体や強い Hertz 相互作用だと固相の結晶性が問題になる。そのようなときには、もう少し斥力を弱くしたソフトコア (斥力) ポテンシャルを用いる場合がある。ソフトコアポテンシャルには幾通りか種類があるが、Lennard-Jones 相互作用の斥力部分を取るのが一般的である。

2.2 積分法、境界条件、物理量の表現

ミクロ自由度である粒子の運動は、基本的には Newton の運動方程式を解いて得ることになるが、積分法や境界条件など工夫しないといけないこともある。積分法では、Runge-Kutta 法などではなく、保存量が保存するようなシンプレクティック解法を用いた方がよい。それは粒子の軌道一つ一つよりも集団としての平均量が重要になることが多いからである。また、境界条件では、単純な周期境界や固定壁 (ポテンシャル力で表現する) はもちろん、状況に応じて温度制御や化学ポテンシャル制御、圧力制御、シア制御などを行わなくてはならない。これらの詳細な技法は、入手しやすい以下の文献[27, 28, 29, 30]によくまとめられているのでここでは繰り返さないことにする。

またミクロな自由度から、マクロな場の量を計算することが必要である。これらは、統計力学や液体論にしたがって計算することができ、たとえば、数密度 $n(z)$ や、応力テンソル $\Pi_{\alpha\beta}(z)$ は、

$$n(z) = \frac{\sum_{i \in z} 1}{V_z} \quad (3)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}(z) = \frac{1}{V_z} \sum_{i \in z} \frac{(\mathbf{p}_i)_\alpha (\mathbf{p}_i)_\beta}{m_i} + \frac{1}{2V_z} \sum_{\substack{i \in z \text{ or } j \in z, \\ (i < j)}} f_\alpha^{i,j} q_\beta^{i,j} \quad (4)$$

として計算できる。ここで、 z は一つの微小領域 (体積 V_z) を指定するインデックスである。和 $\sum_{i \in z}$ は微小領域 z にふくまれる粒子で和を取ることを表している。圧力場の定義で α, β は x, y, z のいずれかを取り、 $(\mathbf{p}_i)_\alpha$ は粒子 i の運動量の α 成分を表す。また、 $f_\alpha^{i,j}$ は、粒子 i と j の間に働く力の α 成分であり、 $q_\beta^{i,j}$ はそれらの粒子間の相対座標の β 成分を表す。第二項の和は、粒子 i もしくは j が考えている微小領域の中に入っているときに和を取り、二つの粒子が同時に入っているときは二重に数える。これは圧力場を運動量の輸送で定義したことになり、微小領域の重心系が正味の運動量を持っているときは、その分の寄与を引かなくてはならない。他の物理量も含め詳細は様々な文献に挙げられている。[31, 32, 33]

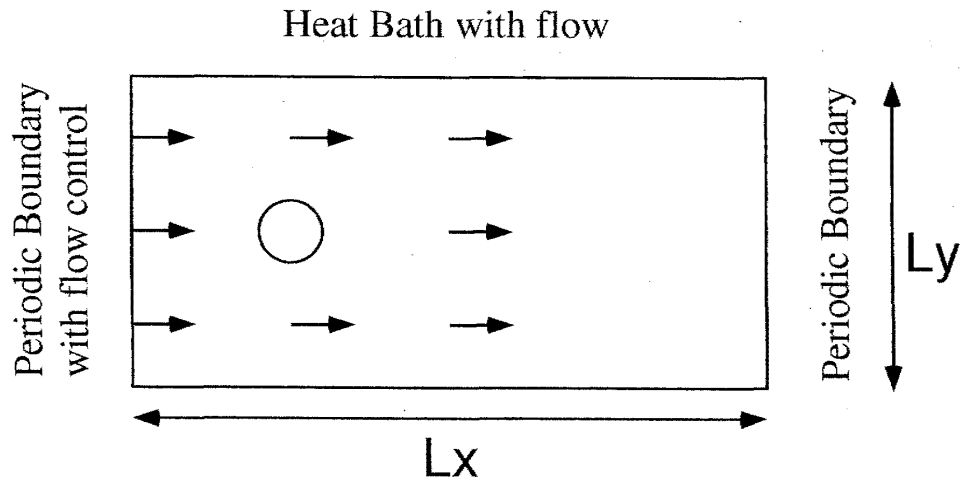


図 1: 計算の設定

3 計算例

3.1 Kármán 渦

ここでは簡単な例として Kármán 渦を発生する不安定性について計算したものを紹介する。計算の詳細は論文 [34, 35] にある。二次元的な流れの中に円柱の障害物があるとき、流れの Reynolds 数に応じて、円柱の後ろに渦が発生し、その渦が剥離するという流体力学的不安定性がおきる。これを剛体円盤をつかった粒子動力学法で計算してみよう。

二次元長方領域中に約 30 万から 57 万個の剛体円盤を入れ、図 1 のように境界を設定する。また系の中心に、円形の障害物を入れておく。この障害物を、入れたものとおなじ剛体円盤を並べ固定したもので表現すると、シミュレーション上の手間が省ける。この状態で剛体円盤粒子を流すと、Reynolds 数に応じて図 2 のような流れのパターンを得ることができる。この計算における不安定化する Reynolds 数は、定量的に連続体の解析や実験とほぼ一致している。ところで Reynolds 数は、連続体の記述では方程式のパラメーターとして入るので自明であるが、今の場合には非自明である。それを決めるためには粘性率を見積もる必要がある。粘性率は密度や温度が決まると統計力学的に決まるパラメーターであるから、例えば線形応答理論を使えば事前に計算することができる。ここでは Poiseuille 流れを使って、そのときの速度プロファイルが放物線になること、その曲率が粘性率と関係しているという事実を使って、事前に評価した値を用いている。このようなマクロなパラメーターを事前に知り得ないのが、われわれの粒子動力学法の弱点の一つである。

計算結果の定量性をさらに調べるため、円柱にかかる抗力を計算しその値を無次元化したものである抗力係数を求めた。その結果をプロットしたのが図 3 である。この図では、実際の実験でもとめられたデータ (曲線) とわれわれの計算結果を横軸を Reynolds 数にと

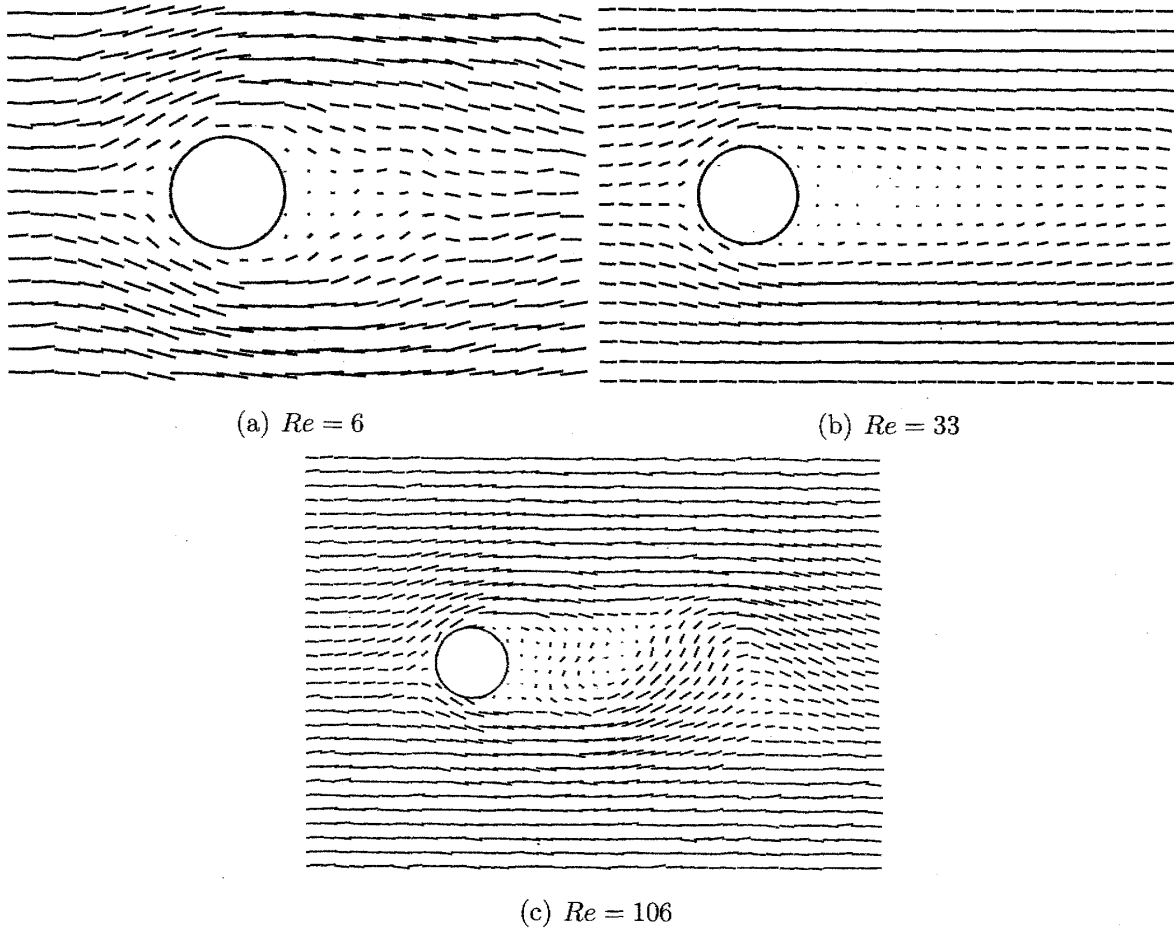


図 2: 流れのパターンのスナップショット。系をメッシュに切りその中に入っている円盤の平均速度を流れの場と見なし、線分として表現した。

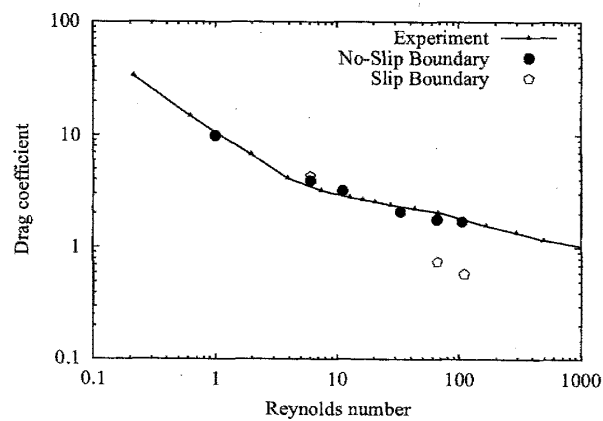


図 3: 抗力係数

りプロットしてある。われわれの結果は二種類のマークがあり、それぞれ円柱表面での境界条件が異なる。円柱表面での境界条件を滑りなし (No-Slip Boundary) にとった黒丸のデータが、実際の実験結果と Reynolds 数に対し二桁以上にわたり定量的に一致していることがわかり、この計算は実際のマクロ系の挙動を定量的に再現していることがわかる。

より大きな Reynolds 数に対して流れを調べようとする、より多くの粒子数を用いなければならない。それは大きな Reynolds 数になるほど、流れに、より小さな構造が出来るからであり、その構造を表現できるだけの粒子数が必要になるからである。ただ逆に言えば、流れのパターンおよび定量的な振る舞いを再現するためには、原理的に必要だと思われる Avogadro 数個の粒子は必要ないということでもあり、再現したい現象に応じた粒子数を準備すればよいということになる。

3.2 相分離ダイナミクス

次の例は、ブルカノ式と呼ばれる火山噴火を模したシミュレーションである。[36] ブルカノ式噴火とは、日本では桜島や雲仙の噴火に見られるような火山爆発であり、比較的粘性の高いマグマが関与する。一般に火山の噴火に対してマグマだけではなくマグマ内部に溶けている揮発性のガスが重要な役割を担う。[37] ブルカノ式噴火の単純化した物理的イメージは、よく振った炭酸飲料のふたをはずしたときの内部の飲料の噴出と重ねることができる。つまり、炭酸ガスの溶け込んだ飲料が蓋をはずしたときの減圧で発泡し、それと同時に飲料が噴き出すというものである。火山では、飲料はマグマ、炭酸ガスはマグマに溶け込んでいる水などのガスである。

ここではそのような噴火を粒子動力学法で再現してみよう。構成粒子間の相互作用として、Lennard-Jones 型のポテンシャルを採用する。Lennard-Jones 型のポテンシャルを用いることにより、気相、液相、固相、またそれらの共存など、マグマのダイナミクスに必要な相は全て再現することができる。また、平衡系の性質がよく知られているので、パラメーターを選ぶときに無駄なシミュレーションを省くことができる。マグマとガスの物性の違いは、Lennard-Jones 粒子のパラメーターを変更することで表現することにする。

系のダイナミクスを支配する 3 次元 N 粒子系のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)}^N \alpha_i \alpha_j \phi(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|) \quad (5)$$

である。 $\phi(r)$ は Lennard-Jones 相互作用ポテンシャルである。また、各粒子の質量 m_i としてマグマ質量を単位 1 とし、ガスは 0.1 を取ることにする。エネルギーの単位 ϵ 、長さの単位 σ はともに 1 に取ることにする。相互作用の前の係数 α_i は、マグマとガスに対して相互作用を変えるためであり、マグマに対しては 1 を、ガスに対しては 0.1 を取るこ

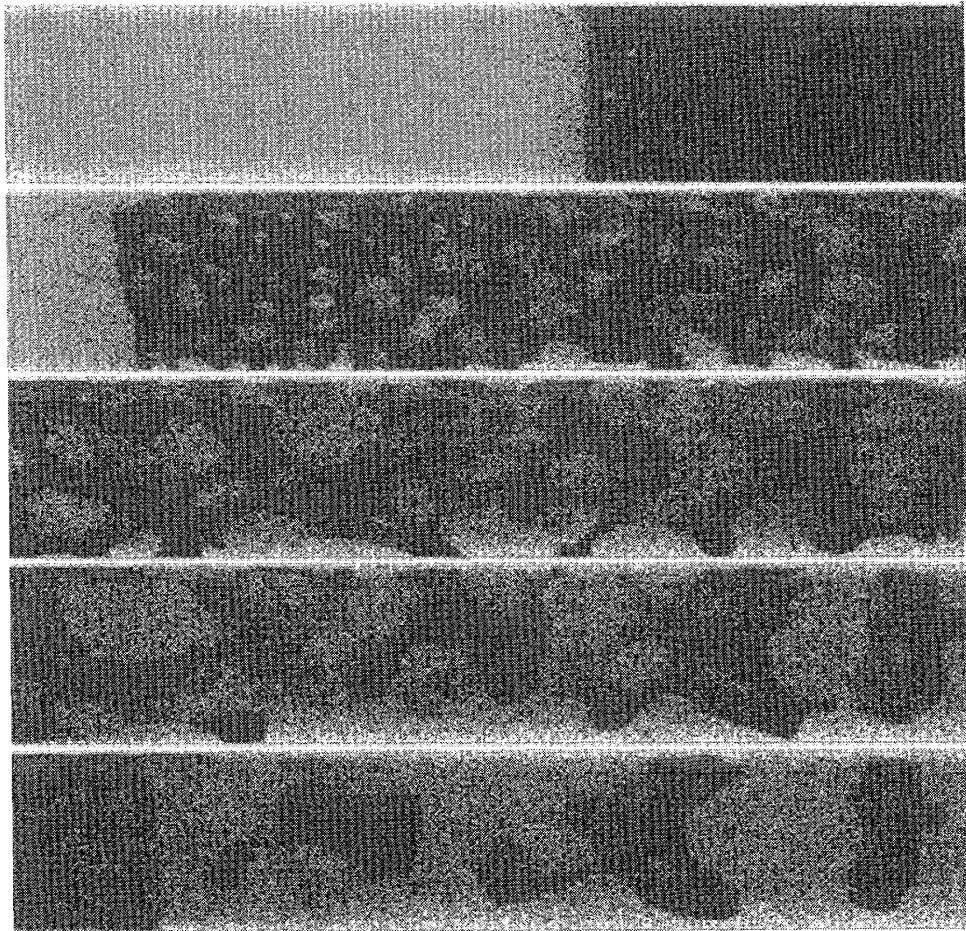


図 4: 二成分 Lennard-Jones 粒子系における火山噴火を模した粒子動力学法のスナップショット。濃い灰色がマグマ成分、薄い灰色がガス成分を表す。上から、噴火後 $t = 40$ 、 $t = 170$ 、 $t = 300$ 、 $t = 400$ 、 $t = 500$ の時刻である。

にする。これでマグマ間の相互作用はガス間の相互作用に対して 100 倍強く働くことになり、マグマとガス成分の物性の違いを表現する。

初期状態として、マグマ成分とガス成分を混合した高温高密度とガス成分のみの低温低密度の二つの領域に分け、それを時刻 $t = 0$ から時間発展させると、高温側から低温側へ爆発が起きる。その際に、高密度側にガスの気泡生成が確認され、その気泡の成長が観測できる。いくつか計算した物理量があるが、ここではそのスナップショットの結果のみを図 4 に示す。図 4 は、系の大きさ $L_x = L_y = 120$, $L_z = 864$ の結果であり、マグマ粒子が 3110400 個、ガス粒子が 794880 個入っている。初期のマグマ溜まりの大きさは 240 である。これをみると、ガスの気泡がマグマの中にある気泡流から、ガス流の中にマグマの液滴がある噴霧流への転移が再現されている。 $t = 300$ 付近が気泡流-噴霧流転移に対応する時間である。また噴霧流に転移したあとでも、気泡の成長やマグマ液滴の構造の変化などが見られる。この規模の計算ではマグマのクラスター解析なども可能になり、噴霧流転

移後からマグマクラスターの数が増えることや、クラスターサイズ分布がべき分布になっていることなどがわかっている。

このように相分離と流れが結合したような現象は、粒子動力学法で簡単に再現できる。このような現象を連続体のモデルで再現することはやってやれないことはないだろうが、粒子動力学法では容易に計算できる。

3.3 その他

ここではふれなかったが流体相と固相の共存系の熱伝導や、シアと熱伝導が結合した系、気液界面構造や、気液界面での熱輸送などの計算も粒子動力学法をもちいて行うことができる。[38, 39, 40, 41] 相互作用が単純であり、起きていることのすべてを計算することができるため、現象を研究することはもちろん非平衡の原理を研究することにも粒子動力学法を使うことができる。

4 まとめと展望

このテキストでは、ミクロな自由度を抽象的な粒子で表現し、それらの集団運動としてのマクロな非平衡挙動を計算するという粒子動力学法に注目して解説してきた。計算機の実力の発展とともに、単なる非平衡現象の計算だけではなく、将来的にはミクロ自由度で構成された複数のマクロ自由度の間の競合ダイナミクスなど、真のマルチスケールシミュレーションが可能になるであろう。21 世紀、計算機を徹底的に活用することで、あらたな計算統計物理の道が開けることを願ってやまない。このテキストが、このゼミを聴講した皆さんの今後の何かの役に立てば幸いである。

謝辞

このテキストを書くにあたり、東京大学理工学専攻の伊藤伸泰さん、島田尚さん、理研の小串典子さん、大阪大学サイバーメディアセンターの菊池誠さんらとの普段からの議論が非常に役に立っている。あらためて感謝したい。また、担当の藤原大資さん、近江崇宏さんには多くのご迷惑をかけたと思う。この場を借りて感謝したい。計算および研究に関しては、物性研究所スーパーコンピュータ共同利用、科研費特定領域「火山爆発のダイナミクス」、科研費若手 (B) No.19740238 などのサポートをうけている。

参考文献

- [1] E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam: "Studies of Non Linear Problems" Los Alamos Report No. LA-1940 (1955). Also included in E. Segré ed. "*E. Fermi, Collected Papers*" (University of Chicago Press, Chicago, 1965).
- [2] B. J. Alder and T. E. Wainwright: "Phase Transition for a Hard Sphere System" J. Chem. Phys. **27**, 1208 (1957).
- [3] B. J. Alder and T. E. Wainwright: "Phase Transition in Elastic Disks" Phys. Rev. **127**, 359 (1962).
- [4] B. I. Halperin and D. R. Nelson: "Theory of Two-Dimensional Melting" Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
- [5] A. P. Young: "Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions" Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
- [6] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless: "Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems" J. Phys. C **6**, 1181 (1973); J. M. Kosterlitz: "The critical properties of the two-dimensional xy model" *ibid.* **7**, 1046 (1974).
- [7] H. Watanabe, S. Yukawa, Y. Ozeki, and N. Ito: "Nonequilibrium relaxation analysis of two-dimensional melting" Phys. Rev. E **66**, 041110 (2002).
- [8] H. Watanabe, S. Yukawa, Y. Ozeki, and N. Ito: "Critical exponents of isotropic-hexatic phase transition in the hard-disk system" Phys. Rev. E **69**, 045103(R) (2004).
- [9] G. E. Moore: "Cramming more components onto integrated circuits" Electronics Magazine, **38**, April 19 (1965). See also Intel web site: <http://www.intel.com/technology/mooreslaw/index.htm>
- [10] J. N. Glosli, K. J. Caspersen, J. A. Gunnels, D. F. Richards, R. E. Rudd, and F. H. Streitz: "Extending Stability Beyond CPU Millennium - A Micron-Scale Atomistic Simulation of Kelvin-Helmholtz Instability" *Supercomputing '07*, Reno, 2007. See also https://publicaffairs.llnl.gov/news/news_releases/2007/images/gordon_bell_journal.pdf
- [11] J. J. Monaghan: "Smoothed particle hydrodynamics" Rep. Prog. Phys. **68**, 1703 (2005).
- [12] S. Koshizuka, H. Tamako, and Y. Oka: "A Particle Method for Incompressible Viscous Flow with Fluid Fragmentation" Comput. Fluid Dynamics J. **4**, 29 (1995).
- [13] S. Koshizuka, and Y. Oka: "Moving-Particle Semi-implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid" Nucl. Sci. Eng. **123**, 421 (1996).
- [14] D. C. Rapaport: "*The Art of Molecular Dynamics Simulation, second edition*" (Cambridge University Press, Cambridge, 2004)
- [15] Hirshfeld and D. C. Rapaport: "Molecular Dynamics Simulation of Taylor-Couette Vortex Formation" Phys. Rev. Lett. **80**, 5337 (1998).

- [16] Hirshfeld and D. C. Rapaport: "Growth of Taylor vortices: A molecular dynamics study" Phys. Rev. E **61**, R21 (2000).
- [17] D. C. Rapaport: "Hexagonal convection patterns in atomistically simulated fluids", Phys. Rev. E **73**, 025301(R) (2006).
- [18] H. Okumura, and N. Ito: "Nonequilibrium molecular dynamics simulations of a bubble" Phys. Rev. E **67**, 045302(R) (2003).
- [19] 津田伸一「気泡核生成 - 成長の分子動力学解析」東京大学大学院工学系研究科 博士論文、2006
- [20] S.-i. Tsuda, S. Takagi and Y. Matsumoto: "A study on the growth of cavitation bubble nuclei using large-scale molecular dynamics simulations" Fluid Dynamics Res. **40**, 606 (2008).
- [21] B. J. Reynwar, G. Illya, V. A. Harmandaris, M. M. Müller, K. Kremer, and M. Deserno: "Aggregation and vesiculation of membrane proteins by curvature-mediated interactions" Nature, **447**, 461 (2007).
- [22] ランダウ、リフシッツ「弾性理論 (増補新版)」佐藤常三、石橋善弘訳、東京図書、1989
- [23] H. Miyagawa and Y. Hiwatari: "Molecular-dynamics study of the glass transition in a binary soft-sphere model" Phys. Rev. A **44**, 8278 (1991).
- [24] W. Kob, and H. C. Andersen: "Scaling Behavior in the β -Relaxation Regime of a Supercooled Lennard-Jones Mixture" Phys. Rev. Lett. **73**, 1376 (1994).
- [25] K. M. Aoki and F. Yonezawa: "Constant-pressure molecular-dynamics simulations of the crystal-smectic transition in systems of soft parallel spherocylinder" Phys. Rev. A **46**, 6541 (1992).
- [26] H.-G. Matuttis, N. Ito, H. Watanabe: "Shape segregation for bidisperse mixtures of ellipses in two dimensions", in "Proceedings of Traffic and Granular Flow 2001", ed. M. Fukui, Y. Sugiyama, M. Schreckenberg, D. E. Wolf, p. 455-460, (Springer, Berlin, 2003).
- [27] M. P. Allen, and D. J. Tildesley: "Computer Simulation of Liquids" (Oxford University Press, New York, 1987).
- [28] Wm. G. Hoover: "Molecular Dynamics", Lecture Notes in Physics 258 (Springer verlag, Berlin, 1986). 日本語訳 田中實 監訳「フーヴァー 分子動力学入門」共立出版、1998
- [29] Wm. G. Hoover: "Computational Statistical Mechanics", (Elsevier Science, Amsterdam, 1991). 日本語訳 小竹進監訳、志田晃一郎訳「計算統計力学」森北出版、1999
- [30] D. J. Evans and G. P. Morriss: "Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids" (Academic Press, London, 1990).
- [31] J. H. Irving and J. G. Kirkwood: "The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes. IV. the Equations of Hydrodynamics" J. Chem. Phys. **18**, 817 (1950).

- [32] J. A. McLennan: *"Introduction to Non-equilibrium Statistical Mechanics"* (Prentice-Hall, New Jersey 1988)
- [33] J.-P. Hansen and I. R. McDonald: *"Theory of Simple Liquids, second edition"* (Academic Press, Amsterdam, 1990).
- [34] T. Ishiwata, T. Murakami, S. Yukawa, and N. Ito: "Particle Dynamics Simulations of the Navier-Stokes Flow with Hard Disks", *Int. J. Mod. Phys. C* **15**, 1413 (2004).
- [35] 石渡竜也「剛体粒子による流れの統計力学シミュレーション」東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修士論文、2002年。ほぼ同じものが、*物性研究* **78**, 717 (2002)にある。
- [36] S. Yukawa, and N. Ito: "Molecular-Dynamics Simulation of Vulcanian Eruption", arXiv:physics/0510147.
- [37] 鍵山恒臣編、東京大学地震研究所編集、地球科学の新展開 3 「マグマダイナミクスと火山噴火」朝倉書房、2003年
- [38] T. Shimada, T. Murakami, S. Yukawa, K. Saito and N. Ito: "Simulation Study on Dimensionality-Dependence of Heat Conduction", *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 3150 (2000).
- [39] T. Murakami, T. Shimada, S. Yukawa, and N. Ito: "Energy Transport in Multiphase System", *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 1049 (2003).
- [40] F. Ogushi, S. Yukawa, and N. Ito: "Heat Conduction of Lennard-Jones Particle System in Supercritical Fluid Phase", *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 827 (2005).
- [41] F. Ogushi, S. Yukawa, and N. Ito: "Asymmetric Structure of Gas-Liquid Interface", *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 073001 (2006).